

структурного разупорядочения. Иными словами, модификация оптических спектров, имеющая место в исследуемых образцах под действием ионно-лучевой имплантации, успешно анализируется в рамках обобщенного правила Урбаха с учетом принципа эквивалентности статического и динамического беспорядка.

Список публикаций:

- [1] Zhang J. Zn. / *Optical properties and spectroscopy of nanomaterials*. // World Scientific Publ. Co Pte. Ltd, 2009. 383 p.
- [2] Вайнштейн И. А., Зацепин А. Ф., Кортов В. С. // ФТТ. 2001. Т. 43. № 2. С. 237.
- [3] Zatsepin A. F., Kuznetsova Yu. A., Sokolov V. I. // *J. Luminescence*. 2017. V. 183. P. 135.
- [4] Мотт. Н., Дэвис Э. / *Электронные процессы в некристаллических веществах*. // Мир. Москва, 1982. 652 с.
- [5] Гельмонт Б. Л., Перель В. И., Ясевич И. Н. // ФТТ. 1983. Т. 25. № 3. С. 727.

## Основное состояние и спектр возбуждений четырёхножной спиновой трубки: расчёт методом матричных произведений

**Тимофеева Анна Сергеевна**

Бострем Ирина Геннадьевна

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина

Бострем Ирина Геннадьевна, к.ф.-м.н.

[anna.timofeeva@bk.ru](mailto:anna.timofeeva@bk.ru)

Рассматривается модель четырёхножной спиновой трубки с тремя видами гайзенберговского обменного взаимодействия, одно из которых является фрустрирующим. Кроме того, что само по себе изучение спиновых трубок представляет теоретический интерес, рассматриваемая в работе спиновая система служит упрощенной моделью квазидвумерного органического ферримагнетика VIPNNBNO, синтезированного группой японских физхимиков [1]. Подробный химический состав и физические параметры можно найти в приведенной выше ссылке. Магнитными свойствами обладают только радикалы NO со спином  $\frac{1}{2}$ . Каждая молекула VIPNNBNO содержит три таких радикала, причем два из них связаны сильным ферромагнитным обменным взаимодействием, и могут рассматриваться как единый узел со спином 1. Органический ферримагнетик демонстрирует характерные для низкоразмерных магнитных систем аномалии на кривой намагничивания (наличие плато намагничивания). Широкое плато в начале кривой намагничивания (4,5 Тл) свидетельствует о наличии щели в энергетическом спектре. Природа появления плато на  $1/3$  и  $2/3$  намагниченности насыщения были объяснены в предшествующих работах [2]. Там же было высказано предположение, что основную роль в формировании плато основного состояния играет фрустрирующее обменное взаимодействие между спинами  $S=1$ . Исследование зависимости величины щели основного состояния от фрустрирующего обменного взаимодействия и составляет цель настоящей работы.

Магнитная структура VIPNNBNO представляет из себя набор одномерных спиновых цепочек из молекул ( $S=1-s=1/2$ ), которые связаны внутрицепочечным антиферромагнитным обменным взаимодействием с обменным интегралом  $J_3$ . Ближайшие цепочки связаны также антиферромагнитно через спины  $\frac{1}{2}$  (межцепочечный обменный интеграл  $J_1$ ), а следующие за ближайшими – фрустрирующим антиферромагнитным обменом с интегралом  $J_2$ . Таким образом, если выделить кластер из 4 бесконечных цепочек и наложить циклические граничные условия в перпендикулярном направлении, то мы и получим четырёхножную спиновую трубку.

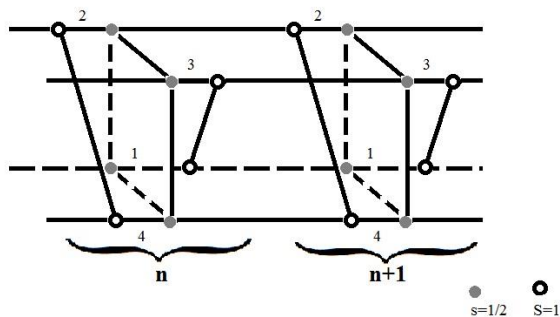


рис.1. Модель четырёхножной спиновой трубки

Модель четырёхножной спиновой трубки представлена на рис.1. Она состоит из повторяющихся блоков  $(\dots, n, n+1, \dots)$ , связанных между собой. Внутри каждого имеем два вида антиферромагнитного межцепочечного взаимодействия. Полный гамильтониан такой системы содержит блочную и межблочную части. Формулы (1) для нахождения блочного и (2) межблочного вклада в энергию соответственно:

$$\hat{H}_n = J_3 \left[ \hat{S}_{n_1} \left( \frac{1}{2} \right) \hat{S}_{n_2} \left( \frac{1}{2} \right) + \hat{S}_{n_2} \left( \frac{1}{2} \right) \hat{S}_{n_3} \left( \frac{1}{2} \right) + \hat{S}_{n_3} \left( \frac{1}{2} \right) \hat{S}_{n_4} \left( \frac{1}{2} \right) + \hat{S}_{n_4} \left( \frac{1}{2} \right) \hat{S}_{n_1} \left( \frac{1}{2} \right) \right] + J_2 \left[ \hat{S}_{n_1} (1) \hat{S}_{n_3} (1) + \hat{S}_{n_2} (1) \hat{S}_{n_4} (1) \right], \quad (1)$$

$$\hat{H}_{n,n+1} = J_1 \left[ \hat{S}_{n_1} (1) \hat{S}_{n+1_1} \left( \frac{1}{2} \right) + \hat{S}_{n_2} \left( \frac{1}{2} \right) \hat{S}_{n+1_2} (1) + \hat{S}_{n_3} (1) \hat{S}_{n+1_3} \left( \frac{1}{2} \right) + \hat{S}_{n_4} \left( \frac{1}{2} \right) \hat{S}_{n+1_4} (1) \right]. \quad (2)$$

Сперва мы рассчитали энергетический спектр одного блока. Затем, используя метод матричных произведений [3], нашли основное состояние спиновой трубки. Было установлено, что в результате увеличения фрустрирующего взаимодействия происходит смена основного состояния как одного блока, так и всей трубки. Качественно результаты метода матричных произведений согласуются с данными по прямой диагонализации [4].

Возбужденное состояние мы рассмотрели как основное с возмущением  $\tilde{g}$ , введённым в  $n$ -ый узел. Была построена пробная волновая функция для оптического магнона с моментом  $k$  и получено выражение для энергии, основной вклад в которую вносит энергия основного состояния.

Дальнейший интерес исследования представляет точка, в которой происходит смена основного состояния и роль фрустрирующего взаимодействия, определяющего поведение щели. Также нас заинтересовало то, как можно учесть симметрию трубки в данных расчётах для сокращения объема вычислений

Список публикаций:

[1] Goto T., Mushnikov N. V., Hosokoshi Y. et al. // *Physica B: Physics of Condensed Matter*. 2003. Vol. 329. P. 1160 -1161.

[2] A.S.Ovchinnikov, V.E.Sinitsyn, I.G.Bostrem et al // *J. Phys.: Condensed Matter*. 2012. 24. 306003 .

[3] A.K.Kolezhuk, H.J.Mikeska, Yamamoto Shoji // *Phys. Rev. B*. 1997. 55. R3336 .

[4] В.Е.Синицын // Расчет выполнен методом прямой диагонализации с использованием программы ALPS

## Нелинейные нормальные моды в углеродных цепочках

Усольцев Олег Андреевич

Сизинцев Дмитрий Андреевич

Южный федеральный университет

Чечин Георгий Михайлович

[oleg-usol@yandex.ru](mailto:oleg-usol@yandex.ru)

В данной работе исследуются нелинейные атомные колебания в карбине, представляющем собой монокристаллическую углеродную цепочку. Этот материал может существовать в двух различных модификациях – кумулен, с двойными химическими связями между атомами углерода, и полиин, с чередованием одинарных и тройных связей. С помощью первопринципных расчетов на основе теории функционала плотности нами было обнаружено смягчение продольной  $\pi$ -моды в некотором диапазоне ее амплитуд в цепочках кумулена, подвергнутых однородному растяжению выше 11% [1]. Это явление удалось объяснить потерей устойчивости старых атомных положений равновесия, относительно которых происходят колебания в цепочках кумулена при малых растяжениях, и возникновением в окрестности каждого из них двух новых положений равновесия относительно которых происходят колебания с мягким типом нелинейности (рис.1). Проблема устойчивости этих новых положений равновесия обсуждалась нами в работе [2].

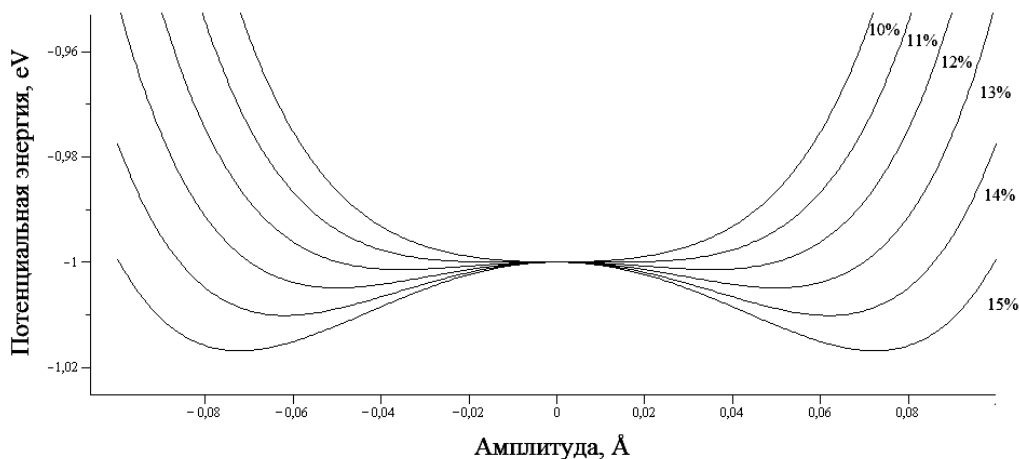


рис.1 Зависимость потенциальной энергии цепочки с потенциалом Леннарда-Джонса при различных ее растяжениях от амплитуды  $\pi$ -моды.